

ПОСЛІДОВНЕ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ Zn^{2+} , Cd^{2+} і Mn^{2+} З 1-(2-ПІРИДИЛАЗО)-2-НАФТОЛОМ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ РАНГОВОЇ АНІГІЛЯЦІЇ

Каліненко О. С., Дрозд А. В.

Харківський національний університет ім.В.Н. Каразіна

drozd@univer.kharkov.ua

Визначення декількох компонентів методами багатоконпонентного аналізу по сумарним спектрам поглинання, що вимірювався в залежності від двох незалежних параметрів, має свої особливості.

Система рівнянь має вигляд:

$$E(m, n_1, n_2) \cdot c(m, 1) = A(n_1, n_2), \quad (1)$$

де: E – тензор молярних коефіцієнтів поглинання (МКП); c – вектор концентрації; A – матриця світлопоглинання; m – число компонентів; n_1, n_2 – число незалежних позицій для двох параметрів, наприклад $n_1 = n_\lambda$ – число довжин хвиль, $n_2 = n_{pH}$ – число значень рН.

Розв'язання такої системи методом РАФА базується на використанні матриці МКП компонента, що визначають. Цю матрицю представляють у вигляді добутку двох векторів:

$$E_j(n_1, n_2) = E1(n_\lambda, 1) \cdot Q(1, n_{pH}), \quad (2)$$

$$c = E1^+ A(Q^+)^T, \quad (3)$$

де: $E1$ – вектор МКП при рН максимального виходу форми, що визначають; Q – вектор виходу того ж компонента від рН, $0 \leq Q \leq 1$.

Мета даної роботи - випробувати варіанти послідовного визначення концентрацій компонентів Zn^{2+} , Cd^{2+} , Mn^{2+} з 1-(2-піридилазо)-2-нафтолом із сумарної двопараметричної залежності світлопоглинання.

Алгоритм розрахунків нами модифіковано.

Розрахунок концентрації по рівнянню $C_{1,k} = E1^{-1} A_0 Q^{-1}$ роводиться багато разів і після кожної ітерації відновлюється матриця $A_k = E1 Q c$ елементи якої при умові $A_k(i, j) < A_0(i, j)$ переносяться в матрицю $A_0(i, j) = A_k(i, j)$.

Після розрахунку концентрації першого компонента знаходять різницеву матрицю $AD = A - A_0$, яку використовують для визначення концентрації другого компонента.

Наведено результати аналізу модельних 2-х і 3-х компонентних сумішей. Особливістю результатів послідовного визначення є накопичення похибок у різницевою двопараметричному спектрі поглинання $\Delta c_{Zn} < \Delta c_{Cd} < \Delta c_{Mn}$.

Похибки визначення в двокомпонентній системі менші, ніж у трикомпонентній.

Наведено співставлення результатів аналізу трикомпонентної суміші з використанням РАФА та класичного МНК при псевдоодномірному представленні спектрів поглинання

$$E(m, N) \cdot c(m, 1) = A(N, 1), \quad N = n_1 \cdot n_2.$$